



TITLE:

6. One-Electron States of an Atom under High Temperature and High Pressure

AUTHOR(S):

矢追, 臣知

CITATION:

矢追, 臣知. 6. One-Electron States of an Atom under High Temperature and High Pressure. 物性研究 1987, 48(5): 672-672

ISSUE DATE:

1987-08-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/92651>

RIGHT:

までずれた。ずれ方が微小なので詳細は不明だが、スピン再配列温度以下の低温で磁気構造が collinear でないとされていることと何か関連があるのかもしれない。

- 3) ニュークリエーション型の磁石には保磁力と異方性に単純な関係が成り立つという経験則が提唱されている (E. Adler, P. Hamann)。この経験則に今回求めた異方性定数を適用すると保磁力とニュークリエーションフィールドの比例定数は室温で $C = 0.47$ となり, E. Adlerらの値 ($C = 0.64$) と異なっているが両者とも SmCo_5 ($C = 0.15$) よりかなり大きい。これにより Nd-Fe-B 磁石がニュークリエーションによる度合の大きい保磁力機構であることがわかる。

6. One-Electron States of an Atom under High Temperature and High Pressure

矢 追 臣 知

Weizsäcker 補正及び交換-相関補正を含み, 任意温度に一般化した Thomas-Fermi 理論から定まる有効ポテンシャルを用いて Schrödinger 方程式を解き, 中性熱浴中に浸された Fe 原子の束縛電子について, その一電子エネルギーと波動関数とを種々の温度と圧縮度に対して計算した ($0 \leq T \leq 1000$ eV; $\rho/\rho_0 = 1, 10, 100$)。その結果, 一定圧縮度に対しては一電子エネルギー準位は温度上昇と共に低下してゆくが, その低下の程度は圧縮度の増大と共に減少すること, 一方, 一定温度に対してはエネルギー準位は圧縮度と共に上昇することが明らかとなった。また, $T = 100$ eV, $\rho/\rho_0 = 1$ の場合のエネルギー値は, 既存の SCF 結果と良い一致を示しており, この種の問題に於ける一般化 Thomas-Fermi ポテンシャルの有用性が示唆された。